
Programme de Formation

Modélisation des équilibres chimiques en solution aqueuse et à l'interface solide-solution



Organisation

Durée : 24 heures

Mode d'organisation : Présentiel

Contenu pédagogique



Public visé

Doctorants, chercheurs, ingénieurs travaillant sur des thématiques en lien avec l'eau (géochimie, chimie environnementale, électrochimie, ingénierie des procédés chimiques), le transport des solutés (hydrogéologie), la biodisponibilité des éléments (biologie, écotoxicologie), les propriétés de surface de (nano)particules minérales en milieu aqueux (physique des (nano)particules/colloïdes, catalyse hétérogène)...



Objectifs pédagogiques

- Comprendre des processus élémentaires en chimie des solutions
- Être capable de lire une base de données au format PHREEQC et de la modifier
- Traduire un problème de chimie à l'équilibre en un fichier d'entrée PHREEQC
- Extraire les informations pertinentes du fichier de résultats



Description

Partie 1 : chimie des solutions et bases d'utilisation de PHREEQC

- Cours (2 h) :
 - Présentation générale, fonctionnements et possibilités offertes par PHREEQC
 - Bref rappel de chimie des solutions et des équations utilisées
- Exemples (2 h) pour se familiariser avec la nomenclature/le langage PHREEQC
- Travaux dirigés (10 h). Exemples :
 - Comment varie la solubilité de l'aluminium en fonction du pH ? Comment varie sa spéciation en solution ?
 - Quel est l'effet d'un ligand organique sur la solubilité de l'aluminium ?



- Sous quel(s) degré(s) d'oxydation se trouve le fer en fonction du pH et du potentiel redox (Eh) ? Quel est l'impact des conditions de pH-Eh sur la solubilité du fer ?

Partie 2 : interface solide-solution

- Isothermes d'adsorption empiriques (ex : Langmuir, Freundlich) (cours 1 h)
- Mécanismes d'échange d'ions (cours + exercice) (cours 1 h, TD 1 h)
- Modèles (semi)mécanistiques de complexation de surface non-électrostatique : exemple des argiles (cours 1 h, TD 1 h)
- Double couche électrique : les différents modèles. Exemples des oxydes métalliques. (cours 1 h, TD 2 h)
- Le modèle MUSIC (pour MULti Site Complexation) : lien entre composition, taille, structure, morphologie des particules et réactivité de surface (cours 2 h)



Prérequis

Connaissances en chimie des solutions (niveau environ L1/L2 selon le parcours universitaire physique/chimie/biologie/géologie : équilibres en solution, complexation, solubilité, oxydo-réduction, etc.).



Modalités pédagogiques

Alternance de cours (10 h) et de TD (14 h).



Moyens et supports pédagogiques

Les participants devront se munir de leur PC (OS Windows) et avoir téléchargé et installé le logiciel (gratuit) PHREEQC à télécharger à l'adresse suivante : <http://pfw.antipodes.nl/download.html>

Un module complémentaire de PHREEQC (appelé Phreeplot, pas de version MAC disponible) est à télécharger à l'adresse suivante : <http://www.phreeplot.org/>

Pour Phreeplot, il est impératif de bien suivre les indications et de tout installer (notamment Ghostscript et GSView). Avant la formation, les participants peuvent contacter le responsable s'ils font face à des difficultés lors de l'installation.



Modalités d'évaluation et de suivi

Un suivi individualisé par des évaluations formatives est assuré. Une attestation de suivi est délivrée à la fin de la formation.



Informations sur l'admission

L'admission à cette formation ne fait l'objet d'aucun examen, test ou sélection préalable ; l'inscription est validée après réception du dossier complet et confirmation par l'organisme de formation.



Informations sur l'accessibilité

Notre organisme s'engage à garantir l'accessibilité de ses formations à distance et en présentiel aux personnes en situation de handicap. Un référent handicap est mobilisable afin d'analyser les besoins spécifiques et de mettre en place, lorsque cela est possible, les adaptations pédagogiques, techniques ou organisationnelles nécessaires.